

数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用  
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書
------------------

田中 健一郎

東京大学大学院情報理工学系研究科  
准教授

最適点配置問題に内在する近似的凸構造の探求と活用

## § 1. 研究成果の概要

2020年度は、統計的学習の分野などで用いられるカーネル求積法に対して、性質の良い標本点を効率的に配置する問題に取り組んだ。このために、求積法の最悪誤差を基にして、適切な目的関数を設定した。その結果、比較的単純で計算負荷の低い方法によって、既存の手法に比べて遜色のない標本点を生成することができた。

カーネル求積法に対しては、対象とする被積分関数の空間として、再生核ヒルベルト空間を考えることが一つの一般的な方法である。この空間においては、最悪誤差が明示的に表されることが良く知られている。この最悪誤差は、求積法に用いられる標本点と重みの関数として与えられ、標本点を固定した時に最適な重みを決めることは比較的容易である。しかし、その上で最悪誤差を標本点の関数として見ると、それは複雑な形をしており、最適な標本点を求めることは難しい。これまで、この最悪誤差の表示を基にいくつかの貪欲算法が考案されているが、それらにおいては、新たな標本点を加える際、基本的に対象領域内の「全探索」が行われている。そのため、それらは超高次元の問題には適用しにくい。そこで、単純で計算負荷の低い方法の開発が望まれる。

本研究では、再生核がガウス核である場合に、最悪誤差の一つの上界を与えた。その上界は、二点間の反発的相互作用を表す項と、正則化項の働きをする項の和で構成されている。そのため、標本点に関する最適化が比較的容易な形となっている。この上界の導出には、ラプラシアンの基本解を用いた。そして、これを用いて各点を一つずつ勾配法で更新していく方法を考案した。その結果、既存の手法に比べて遜色のない標本点を生成することができた。ただし、正則化項の決め方やいくつかのパラメータの決め方には、理論的な裏付けが与えられていない。それらは今後の課題である。

本研究の成果は論文にまとめて投稿中であり、また同時にプレプリントを公開している。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Ken'ichiro Tanaka: Kernel quadrature by applying a point-wise gradient descent method to discrete energies, arXiv:2102.10887.